

СТОХАСТИЧЕСКАЯ СЕТОЧНАЯ МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО ВОДОРОДА НА ПОВЕРХНОСТИ ПЫЛИ В МЕЖЗВЕЗДНОЙ СРЕДЕ

М. Г. Медведев, А. Б. Островский, А. И. Васюнин
Уральский федеральный университет

В рамках метода случайного блуждания на двумерной решетке с непрерывным временем мы реализовали стохастическую модель, оценивающую эффективность формирования молекулярного водорода в условиях, характерных для межзвездной среды. Метод позволяет рассматривать неоднородные по свойствам поверхности. Получены зависимости эффективности образования молекулярного водорода от температуры и от вариации энергии связи атомов с поверхностью. Дополнительно было рассмотрено влияние неопределенности значения отношения энергии диффузии к энергии десорбции на поверхности пылинки.

STOCHASTIC ON-LATTICE SIMULATION OF H_2 FORMATION ON INTERSTELLAR GRAINS

M. G. Medvedev, A. B. Ostrovskii, A. I. Vasyunin
Ural Federal University

We realized stochastic model evaluating efficiency of recombination H_2 in interstellar medium based on the approach of the continuous-time random walk on two-dimensional lattice. This method allows to model inhomogeneous surfaces. We estimate recombination efficiency as a function of model parameters. The influence of uncertainty of diffusion/desorption energy ratio on molecular hydrogen recombination was considered also.

Введение

Молекулярный водород является важнейшей молекулой для процессов в межзвездной среде (МЗС), поскольку он участвует в быстрых реакциях с обменом заряда, реакциях с космическими лучами, приводящих к образованию более сложных молекул и оказывает сильное влияние на процессы динамической эволюции облаков. Формирование молекулярного водорода в условиях МЗС протекает эффективно только на поверхности пылинок. Методы моделирования химической эволюции среды, основанные на балансных уравнениях, не позволяют учитывать особенности процессов на поверхности пылевой частицы, это может быть сделано с помощью методов стохастического моделирования, учитывающих структуру поверхности пылинки.

Цель данной работы — реализовать модель, основанную на методе случайных блужданий частиц по двумерной поверхности, для получения зависимостей эффективности образования молекулярного водорода от различных параметров модели.

Случайные блуждания с непрерывным временем

В соответствии с методом, описанным в [1], роль поверхности пылинки исполняет тетрагональная (четыре соседних узла) или гексагональная (шесть соседних узлов) решетка. В модели на текущий момент участвуют только атомы водорода и молекулы водорода. Атомы водорода могут осаждаться из газовой фазы на решетку и связываться с поверхностью слабыми силами физисорбции. Осаждение происходит в узлах, которым соответствуют потенциальные ямы, глубина которых зависит от материала и в случае неоднородной поверхности может отличаться от узла к узлу.

Атомы могут совершать прыжки на любые соседние узлы за счет тепловой диффузии, скорость протекания которой определяется энергией диффузионного барьера E_b . Все направления для прыжков равновероятны. В случае если узел в выбранном направлении занят другим атомом водорода, происходит реакция формирования молекулы. В реализованной модели молекула немедленно десорбирует в газ; считать маловероятным то, что молекула останется на поверхности, нам позволяет тот факт, что реакция образования H_2 экзотермическая и в ней выделяется энергия в 4.5 эВ, тогда как энергия связи молекулы с поверхностью около 0.03 эВ.

Образованию молекул водорода на поверхности пылинки противодействует десорбция атомов водорода с поверхности, происходящая посредством термического испарения. Энергия десорбции E_d выше энергии диффузионного барьера E_b . Как правило, считается, что отношение E_b/E_d постоянно, но точное значение неизвестно и в литературе варьируется от 0.3 до 0.77 [2]. В нашей модели рассматривается и тот случай, когда это отношение меняется от узла к узлу случайным образом в пределах этого диапазона.

В модели принимаются во внимание три типа пуассоновских процессов: осаждение, диффузия и десорбция. Интервалы времени между двумя последовательными событиями (далее — время ожидания события) таких процессов подчиняются экспоненциальному распределению [3]. Непрерывность времени понимается в том смысле, что следующее событие может произойти в любой момент — время в модели не дискретизировано.

На каждом шаге алгоритма происходит определение времени ожидания события WT_a для каждого процесса типа a по следующей формуле:

$$WT_a = -\frac{\ln X}{b_a}, \quad (1)$$

где X — равномерно распределенная случайная величина от 0 до 1; b_a — скорость протекания процесса a , c^{-1} .

После того как определены времена ожидания для события адсорбции, событий диффузии и десорбции для каждого из атомов, находящихся на решетке, из всех полученных времен выбирается наименьшее и в модели происходит событие, соответствующее этому времени, а время в модели увеличивается на это минимальное время ожидания. После выполнения некоторого числа итераций (зависящего от параметров модели) модель достигает стационарного состояния, для которого и находится эффективность рекомбинации. В процессе моделирования параметры модели остаются постоянными.

В случае неоднородной по энергии десорбции поверхности нам неизвестен вид распределения значений энергий десорбции по узлам. В нашей модели распределение считается экспоненциальным. Под этим подразумевается, что значение энергии на узле вычисляется следующим образом:

$$E_d = E_{d0} + \Delta E_d, \quad (2)$$

где E_{d0} — минимальное значение энергии десорбции; ΔE_d — экспоненциально распределенная положительная величина (отклонение от значения минимальной энергии десорбции).

Параметризовать экспоненциальное распределение можно через нормализованное отклонение $\sigma = \Delta E_d / \bar{E}_d$ [1]. Задавая нормализованное отклонение и используя базовые значения энергий десорбции в качестве среднего, мы можем вычислить среднее значение отклонения ΔE_d и минимальное значение энергии десорбции E_{d0} , что затем позволяет нам получить экспоненциально распределенные значения энергий десорбции.

В расчетах моделировались оливиновые и углеродные пылинки с тетрагональными и гексагональными решетками. Для оливиновых пылинок базовое значение энергии десорбции — 373 К, энергии диффузии — 287 К. Для углеродных пылинок базовое значение энергии десорбции — 658 К, энергии диффузии — 511 К. Плотность среды 300 см^{-3} . Температурный диапазон от 5 до 30 К.

Результаты

Эффективность образования молекулярного водорода (далее — рекомбинации) определяется следующим образом:

$$\eta = \frac{2N_{H_2}}{N_H}, \quad (3)$$

где $2N_{H_2}$ — число образовавшихся молекул водорода; N_H — число осажденных атомов водорода за один интервал времени.

На рис. 1 показано, что образование молекул водорода проходит эффективно лишь в узком диапазоне температур от 6 до 9 К для оливина и от 11 до 16 К для углерода, что согласуется и с результатами моделирования в [1]. Также здесь показано, что результаты для гексагональной и тетрагональной решеток отличаются мало, поэтому далее будем приводить результаты только для тетрагональной решетки.

При увеличении нормализованного отклонения, задающего разброс значений энергии десорбции, и при фиксированном отношении E_b/E_d диапазон температур, в котором образование молекулярного водорода проходит эффективно, увеличивается (рис. 2).

Характерные времена выхода на стационарное состояние моделями составляют от 10^6 до 10^7 с (для плотности газа в среде $n_H = 300 \text{ см}^{-3}$), при этом моделям с высокой степенью неоднородности поверхности необходимо большее время, чем моделям с низкой степенью неоднородности.

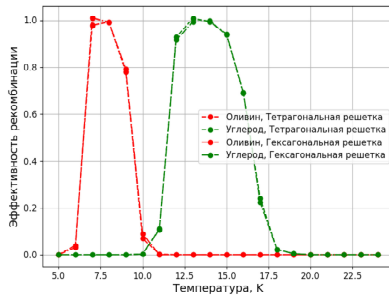


Рис. 1. Зависимость эффективности рекомбинации от температуры для однородных оливиновой и углеродной пылинок для решеток тетрагонального и гексагонального типа

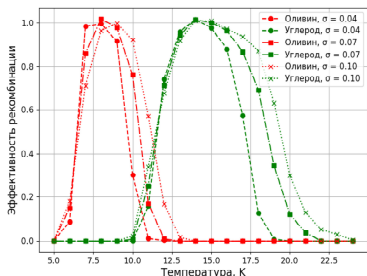


Рис. 2. Зависимость эффективности рекомбинации от температуры для неоднородных оливиновой и углеродной пылинок при различных значениях нормализованного отклонения

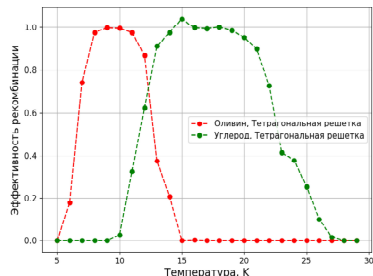


Рис. 3. Зависимость эффективности рекомбинации от температуры для неоднородных оливиновой и углеродной пылинок при нормализованном отклонении $\sigma = 0.1$ с равномерно распределенным случайным значением E_b/E_d на узлах

На рис. 3 приведен результат моделирования при случайном равномерно распределенном в пределах от 0.3 до 0.77 значении отношения E_b/E_d в узлах со случайным экспоненциально распределенным значением энергии десорбции при нормализованном отклонении $\sigma = 0.1$. С такими параметрами рекомбинация становится эффективной на еще более широком диапазоне температур: от 6 до 14 K для оливина и от 11 до 25 K для углерода.

Заключение

Полученные с помощью моделирования результаты очень хорошо согласуются с результатами в [1], где реализуется аналогичный метод, что позволяет нам говорить о том, что описанный подход реализован верно.

Приведенные зависимости эффективности рекомбинации от температуры для различных параметров говорят о том, что чем больше неоднородность поверхности, тем более эффективна в целом рекомбинация. Причем расширение интервала происходит за счет сдвига правой границы, т. е. за счет того, что десорбция атомов с поверхности становится менее эффективной.

АИВ благодарит за поддержку проект Государственного задания FEUZ-2020-0038.

Библиографические ссылки

- [1] *Chang Q., Cuppen H. M., Herbst E.* Continuous-time random-walk simulation of H_2 formation on interstellar grains // *Astron. Astrophys.* — 2005. — Vol. 434, № 2. — P. 599–611.
- [2] *Vasyunin A. I., Herbst Eric.* A Unified Monte Carlo Treatment of Gas-Grain Chemistry for Large Reaction Networks. II. A Multiphase Gas-surface-layered Bulk Model // *Astrophys. J.* — 2013. — Vol. 762, № 2. — P. 86. 1211.3025.
- [3] *Gillespie Daniel T.* A General Method for Numerically Simulating the Stochastic Time Evolution of Coupled Chemical Reactions // *Journal of Computational Physics.* — 1976. — Vol. 22, № 4. — P. 403–434.